

## Aprendizado de máquina aplicado a processo de secagem de catalisador de craqueamento catalítico

Victor Carvalho Gomes <sup>a,\*</sup>, Maurício B. de Souza Jr. <sup>a,b</sup>, Argimiro R. Secchi <sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Programa de Engenharia Química - COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro - RJ, Brasil

<sup>b</sup> EPQB - EQ/UFRJ, Rio de Janeiro - RJ, Brasil

\*vcarvalho@peq.coppe.ufrj.br

### RESUMO

A secagem por spray (*Spray Drying*) é um processo que se destaca principalmente nos ramos alimentício, farmacêutico e da mineração. É uma técnica que possui algumas vantagens, como o controle de propriedades físicas da partícula (densidade aparente e tamanho de partícula) a partir de variáveis de processo. Diferentes propostas de modelagem para esse processo são encontradas na literatura, dependendo do objetivo. Modelos fenomenológicos são utilizados para balanços de energia, cinética de secagem e controle de eficiência térmica e, desde o início dos anos 2000, trabalhos com aplicação de fluidodinâmica computacional (CFD) têm se tornado mais comuns, para prever a trajetória das partículas e o perfil espacial de variáveis de processo. Devido ao comportamento não linear de variáveis, estudos de aplicação de *Machine Learning* (ML) também têm se tornado frequentes, buscando a predição de variáveis de processo e de qualidade dos produtos para controle ou otimização de processos. O objetivo deste trabalho é aplicar algoritmos de ML no processo de secagem de catalisadores de craqueamento catalítico da FCC S.A., visando a um modelo estático de predição de resultados de qualidade do produto. As variáveis preditas são a densidade e o tamanho de partícula do catalisador (análises de laboratório), com dados obtidos do sistema LIMS (*Laboratory Information Management System*), de 2008 a 2023. As entradas são variáveis de processo como vazão e teor de sólidos da suspensão que alimenta o secador, a rotação do atomizador, a vazão de ar do classificador de partículas, sendo os dados obtidos através do sistema PIMS (*Plant Information Management System*) Osisoft PI, considerando o tempo morto entre mudanças no processo e o momento de amostragem/análise, também de 2008 a 2023. Os dados foram filtrados para uma única formulação de catalisador (cerca de 6000 linhas), para isolar efeitos de composição, e foi feita remoção de casos com dados faltantes e um filtro de outliers baseado em desvios-padrão. Valores Shapley foram utilizados como critério de importância para seleção de variáveis de entrada e foi avaliado o uso de técnicas de redução de dimensionalidade (PCA e *auto-encoders*). Os modelos utilizados foram regressão linear multivariada e redes neurais de múltiplas camadas. Ambos mostraram capacidade de predição semelhante, com coeficientes  $r^2$  de teste entre 0.6 e 0.7, com pequena vantagem para as redes neurais, valores satisfatórios para se tentar utilizar em problemas industriais. A utilização de redução de dimensionalidade não contribuiu significativamente para melhora dos modelos. O que mais atrapalhou o processo de treinamento e validação dos modelos foi que, apesar da grande quantidade, se observou que grande parte do banco de dados (cerca de 3000 linhas, metade do total) não era boa para utilização no treinamento ou validação devido à pouca variância (monotonia dos dados). Sendo assim, como melhoria, o trabalho sugere que a planta invista na disponibilização de dados outras variáveis (dados de matérias-primas) de forma mais organizada para aquisição, que se realizem experimentos variando condições de processo e que sejam usados dados de produtos semelhantes ou tornar a formulação uma variável de entrada, buscando maior quantidade e variância de dados para enriquecer o treinamento dos modelos.

**Palavras-chave:** Spray Dryer, Secagem, Aprendizado de Máquina, Redes Neurais, Regressão.

**Agradecimentos:** ao PEQ COPPE e a Fábrica Carioca de Catalisadores S.A.

### Referências

Birchal, V. S., Huang, L., Mujumdar, A. S., & Passos, M. L.: Spray dryers: modeling and simulation, *Drying Technology*, 24(3), 359-371, 2006.



Realização:

